

Поскольку множитель перед  $M_{l,j}^{\Gamma-\text{Л}}(k)$  в правой части (10) не меньше единицы, то (как и в случае статических дипольных моментов (см. (8)) имеем соотношение

$$|M_{l,j}(k)| \geq |M_{l,j}^{\Gamma-\text{Л}}(k)|. \quad (12)$$

Таким образом, можно сказать, что экситонные состояния кристалла с несколькими возбужденными молекулами характеризуются большими (по сравнению с Г—Л приближением) значениями дипольных моментов (формулы (8) и (12)).

Как видно из (9) и (11), дипольные моменты  $M_{l,j}$  переходов между компонентами давыдовского расщепления выражаются<sup>1</sup> через  $\Delta\mu_b^f$  — изменения (при переходе в возбужденное состояние) статических дипольных моментов молекул, образующих кристалл. По этой причине в данном приближении смешивание электрическим полем экситонных состояний, спектрально проявляющееся в расщеплении и выравнивании интенсивностей соответствующих полос, возможно наблюдать только в кристаллах с молекулами, изменяющими статический дипольный момент ( $\Delta\mu_b^f \neq 0$ ) при переходе в возбужденное состояние.

В заключение можно сказать, что формулы (4)—(12) определяют, с одной стороны, дипольные моменты экситонных состояний и выражают правила комбинации дипольных молекул при агрегации последних в кристалл, а с другой — позволяют оценить в каждом конкретном случае, насколько существен при расчете дипольных моментов и интерпретации спектров эффекта Штарка учет более высоковозбужденных состояний кристалла.

Автор благодарит Л. М. Блинова за полезное обсуждение.

#### Литература

- [1] А г р а н о в и ч В. М. Теория экситонов. М.: Наука, 1968.
- [2] Д а в ы д о в А. С. Теория молекулярных экситонов. М.: Наука, 1968.
- [3] Д у б и н и н Н. В. Опт. и спектр., 1977, в. 1, т. 43, с. 91; 1977, т. 43, в. 2, с. 368.
- [4] Д у б и н и н Н. В. Опт. и спектр., 1978, т. 44, в. 2, с. 293.
- [5] К л е в а н и к А. В. Опт. и спектр., 1979, т. 46, в. 4, с. 710.

Поступило в Редакцию 29 марта 1982 г.

УДК 537.531 : 535.3

Опт. и спектр., т. 56, в. 3, 1984

## О РЕНТГЕНОВСКОЙ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ОТРАЖАТЕЛЯ ПРИ ПОЛНОМ ВНЕШНEM ОТРАЖЕНИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

Смирнов Л. А.

Полное внешнее отражение рентгеновских лучей сопровождается, как показано в [1], рентгеновой флуоресценцией отражателя и комптоновским рассеянием первичного излучения. Интенсивность этих излучений зависит от угла скольжения первичного пучка, испытывая резкий подъем в области критического угла. В работе [1] автор ограничился изложением результатов эксперимента и не предложил какой-либо модели явления, позволяющей выполнить расчеты и исследовать его количественную сторону. В данной работе предлагается такая модель и приводятся результаты выполненных на ее основе расчетов.

<sup>1</sup> Этот факт не был принят во внимание в публикации [5], в которой, в частности, содержится ошибочное утверждение о якобы неучтенном в [4] смешивании полем компонент давыдовского расщепления. На самом же деле после подстановки в (8.1) [5] выражения для  $M_{12}$  димера [3, 4] получается формула (2) из [4]. Рис. Б в [5] не точен, так как в рамках рассматриваемого в [5] приближения у димера, состоящего из бездипольных молекул, вообще не должно быть эффекта Штарка [4]. Отдельные правильные результаты, содержащиеся в [5] (формулы (7.1) и (7.2)), получены в более ранних работах [3, 4].

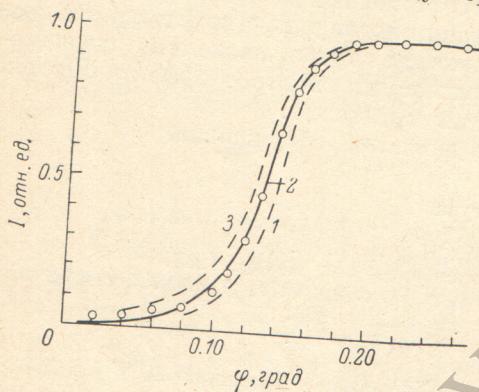
Допустим, что поверхность отражателя имеет неровности, не превосходящие по высоте нескольких сотен ангстрем, с крутыми склонами, наклон которых много больше критического угла  $\varphi_0$ . Будем называть эти неровности шероховатостью [2]. Можно показать, что при выполнении определенных условий [3], влияние шероховатости на полное внешнее отражение можно описать переходным слоем с усредненной плотностью  $\bar{\rho}(z)$ , которая плавно возрастает от нуля на границе с вакуумом до максимального значения  $\rho_0$  на границе со сплошным отражателем. В этом случае отражение и сопровождающие его явления могут быть исследованы с помощью уравнения, описывающего распространение электромагнитных волн в неоднородной среде [4],

$$\nabla^2 E + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon E + \nabla \left( \frac{1}{\epsilon} (\nabla \epsilon E) \right) = 0, \quad (1)$$

где  $\epsilon$  — комплексная диэлектрическая постоянная среды, являющаяся функцией координат.

В наших условиях уравнение (1) можно упростить. Во-первых, в силу ма-

стности угла скольжения  $\varphi$  между первичным пучком и отражающей поверхностью можно не рассматривать по отдельности  $s$  и  $p$  составляющие вектора  $E$ , что позволяет придать уравнению (1) скалярный характер. Во-вторых, можно



Зависимость интенсивности флуоресценции  $G_e$ , напыленного на стеклянную подложку, от угла скольжения первичного пучка  $\varphi$ .

Длина волны первичного излучения — 0.71 Å. Плотность пленки принята равной 85% от плотности сплошного  $G_e$ . Полуширина инструментальной кривой  $w$  в формуле (5) — 0.03. Точки — экспериментальные данные из [1]. 1—3 — расчетные кривые для  $\sigma$ , равного соответственно 0, 100 и 200 Å. Кривая 2 обеспечивает наилучшее совпадение расчетных и экспериментальных данных.

ограничиться рассмотрением значений  $E(r)$  только на оси  $z$  (для того чтобы подчеркнуть это обстоятельство, обозначим эти значения символом  $F(z, \varphi)$ ). При этих условиях уравнение (1) можно привести к виду

$$F''_{zz}(z, \varphi) + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} (\varphi^2 - \epsilon u(z)) F(z, \varphi) = 0, \quad (2)$$

где  $u(z)$  равно нулю в вакууме, равно  $\bar{\rho}(z)/\rho_0$  в переходном слое и равно единице в сплошном отражателе.

Решение уравнения (2) в сплошном отражателе представляет собой волну, идущую в глубь, в то время как в переходном слое при углах  $\varphi$ , меньших критического угла  $\varphi_0$ , существует также отраженная волна, идущая наружу в вакуум. Сложение этих двух волн образует стоячую волну. Генерация флуоресценции на глубине  $z$  пропорциональна квадрату модуля стоячей волны  $|F|^2$  и плотности переходного слоя  $\bar{\rho}(z)$ . Полная интенсивность флуоресценции пропорциональна интегралу

$$I_\Phi(\varphi) = \int_{-\infty}^{+\infty} |F(z, \varphi)|^2 \bar{\rho}(z) dz. \quad (3)$$

Угловая зависимость интенсивности комптоновского рассеяния  $I_k(\varphi)$  отличается от  $I_\Phi(\varphi)$  только постоянным множителем, поэтому одновременная регистрация комптоновского и флуоресцентного излучений не приведет к искаражению формы  $I_k(\varphi)$  и  $I_\Phi(\varphi)$ .

По описанной выше схеме был проведен расчет зависимости  $I_\Phi(\varphi)$  в соответствии с условиями эксперимента, выполненного в [1]. Решение уравнения (2)

и вычисление интеграла (3) находились методами численного интегрирования. Плотность переходного слоя  $\bar{\rho}(x)$  полагалась равной

$$\bar{\rho}(x) = \frac{\rho_0}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{t^2}{2\sigma^2}} dt, \quad (4)$$

где  $\sigma$  — среднеквадратичное отклонение поверхности от средней плоскости. Толщина слоя ограничивалась пределами  $(-3\sigma < z < 3\sigma)$ .

Для того чтобы учесть влияние разрешающей способности прибора, расчетная кривая размывалась с помощью свертки [5]

$$I(\varphi) = \int I_\Phi(x) g(\varphi - x) dx. \quad (5)$$

Функция  $g(\varphi - x)$ , описывающая эффект инструментального расширения, была выбрана нами в виде

$$g(\varphi - x) = \frac{1}{1 + 4 \left( \frac{\varphi - x}{W} \right)^2}, \quad (6)$$

где  $w$  — ширина «инструментальной кривой» на половине высоты в градусах, а  $x$  — переменная интегрирования.

Подбором значений  $\sigma$ ,  $\rho_0$  и  $w$  можно получить хорошее согласие расчетных и экспериментальных данных, как это видно на рисунке. По нашему мнению, это согласие говорит лишь о правильности выбранной нами модели явления, но на точность полученных значений  $\sigma$  и  $\rho_0$  нельзя полагаться по следующей причине. Во-первых, вид расчетной кривой сильно зависит от функции  $g(\varphi - x)$ , о которой в [1] нет никаких сведений. Мы выбрали ее в форме (6) лишь потому, что эта функция часто используется для учета инструментального расширения [5]. Во-вторых, необходима большая точность в отсчете углов. Заниженное значение плотности пленки, полученное нами (0.85 от плотности силошного Ge), можно объяснить, например, ошибкой в измерении углов на сорок угловых секунд. Так как оценка ошибки такого рода в [1] не приводится, то полученное значение  $\rho_0$  нельзя считать достоверным.

Мы полагаем поэтому, что флуоресценция отражателя при полном внешнем отражении может быть использована для оценки  $\sigma$  в том случае, если точно известны плотность отражателя, кривая инструментального расширения  $g(\varphi - x)$  и обеспечена достаточная точность измерения углов отбора излучения.

#### Литература

- [1] Yoneeda Y. Phys. Lett. A, 1980, v. 76, N 2, p. 152.
- [2] Технология тонких пленок (справочник)/Под ред. Л. Майссела и Р. Глэнга, пер. с англ. М.: Сов. радио, 1977, т. 1, с. 509.
- [3] Смирнов Л. А. Опт. и спектр., 1977, т. 46, в. 3, с. 593.
- [4] Бреховских Л. М. Волны в слоистых средах. М.: Наука, 1973.
- [5] Китайгородский А. И. Рентгеноструктурный анализ мелкокристаллических и аморфных тел. М.—Л.: ГИТТЛ, 1952, с. 140.

Поступило в Редакцию 4 июня 1982 г.

УДК 535.317.1

Opt. и спектр., т. 56, в. 3, 1984

## ВОССТАНОВЛЕНИЕ БЕЗАБЕРРАЦИОННОГО ФРОНТА ГОЛОГРАММОЙ

Михайлов И. А.

В ряде задач, таких как интерферометрические исследования, контроль качества оптических деталей и др., необходимо сформировать безаберрационный световой фронт. Применяемая для этой цели сложная дорогостоящая оптика может быть с успехом заменена голографическими оптическими элемен-